

Параллельная реализация программы для вычисления объема молекул фуллеренов

И.М. Губайдуллин¹, Д.Ш. Сабиров¹, А.Д. Сайтгалина²

Институт нефтехимии и катализа РАН¹,
Башкирский государственный университет²

Фуллерены представляют собой особый класс полых полиэдрических молекул. С момента открытия C_{60} и C_{70} сразу же стали рассматриваться разные варианты образования их эндодральных комплексов – топологических соединений, в которых атом или группа атомов расположены во внутренней полости фуллерена [1]. Интерес к таким комплексам обусловлен многими причинами. В частности, такие комплексы предполагается использовать в качестве блоков наноустройств и нанокапсул для хранения газов. В настоящее время получены эндофуллерены с различными инкапсулированными атомами (He, Ne, Ar и др.) и малыми молекулами (H_2 , N_2 , CO) [1], а также теоретически показана возможность образования таких комплексов с более сложными молекулами и коллективами молекул (например, $nH_2@C_{60}$, $C_6H_6@C_{60}$ и др.). Перечень атомов и молекул, вводимых внутрь каркасов фуллеренов и их производных будет расширяться, в связи с чем необходима предварительная оценка возможностей образования эндодральных комплексов, заключающаяся в сравнительном анализе геометрических параметров каркаса фуллерена и вводимых в его внутреннюю полость атомов и молекул. При этом ключевым параметром, характеризующим возможность инкапсулирования, является внутренний объем фуллерена, который может изменяться при переходе от одного фуллерена к другому, а также при функционализации их молекул.

На первом этапе этого исследования разработан алгоритм вычисления объема макромолекул, в основе которого лежит разбиение полиэдрической молекулы на симплексы (пирамиды), вычисление их объемов и последующее суммирование. Предложенный алгоритм допускает использование технологии параллельных вычислений, что позволяет сократить время при решении поставленной задачи. Программный комплекс «Volume», реализующий этот алгоритм, предполагается использовать для поиска фуллеренов и их производных с необходимыми значениями объема внутренней полости и оценки возможности их инкапсулирования.

Программа «Volume» была использована для изучения зависимости объема фуллеренов от числа атомов в молекуле, которая, как показали вычисления, не является линейной (рис. 1).

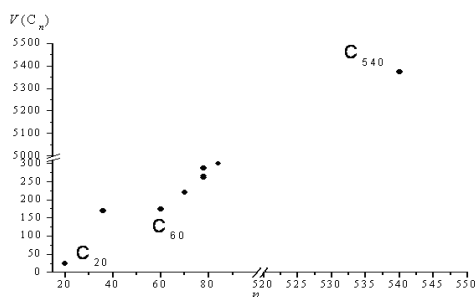


Рис. 1. Зависимость объема фуллеренов $V(C_n)$ от числа атомов в молекуле

Установлено (см. рис. 1), что изомеры фуллерена C_{78} , характеризующиеся одинаковым числом атомов в молекуле, но разными точечными группами симметрии, имеют неодинаковые объемы.

Литература

1. Y. Rubin. Ring Opening Reactions of Fullerenes: Designed Approaches to Endohedral Metal Complexes // Topics in Current Chemistry, 1999, V. 199, P. 67-91.